

Reakční kinetika

Reakční kinetika

- Nauka zabývající se rychlostí chemických reakcí a ovlivněním rychlosti těchto reakcí
- Vymezení pojmů :
- **chemická reakce** je děj, při kterém zanikají výchozí látky a vznikají látky nové
- **reakční mechanismus** jsou chemické změny probíhající na atomární úrovni

Rozdělení chemických reakcí

1. podle počtu fází

- homogenní – reakce probíhá v jediné fázi
- heterogenní – reakce probíhá na styku dvou fází

2. podle typu částic

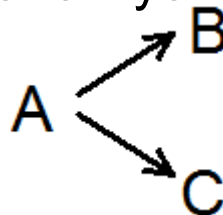
- molekulové
- iontové
- radikálové

Rozdělení chemických reakcí

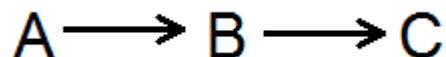
- izolované (probíhají v soustavě jako jediné)
- simultánní (probíhá více reakcí současně)
 - **reakce zvrtné** – reakce probíhá najednou oběma směr



- **reakce bočné** – více reakcí vychází z jednoho nebo více společných reaktantů



- **reakce následné** – produkty jedné reakce jsou výchozími látkami další reakce



Reakční kinetika

- Reakční rychlost
 - počet reakcí, které v systému proběhnou ve sledovaném čase

$$v = \frac{\text{počet reakcí v objemu}}{\text{čas}}$$

Reakční kinetika

- je jedno, pomocí které látky vyjádříme počet proběhlých reakcí
 - pro každou z látek to musí být stejné množství reakcí
- reakční rychlost je tedy:
 - úbytek látkového množství jedné z výchozích látek v čase
 - přírůstek látkového množství jednoho z produktů v čase

Reakční kinetika

- pro reakce probíhající za konstantního objemu je výhodné používat změnu koncentrace
 - změna látkového množství v objemu

$$c = \frac{n}{V}$$

$$\Delta c = \frac{\Delta n}{V}$$

Reakční kinetika

- protože se koncentrace zúčastněných látek během reakce mění (reaktantů ubývá, produktů přibývá), mění se i rychlost reakce
 - rychlost reakce se s časem snižuje
 - závisí na okamžité koncentraci látek
 - okamžitá rychlost $v_A = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$ $v_D = \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$
 - je vztažená ke konkrétní látce

Reakční kinetika

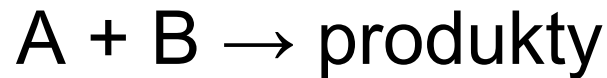
Molekularita reakce

Počet částic, které se musí srazit, aby reakce proběhla

- monomolekulární – rozpad či přeměna 1 molekuly
- nejpravděpodobnější a tedy nejběžnější jsou reakce bimolekulární (srážka 2 částic)
- pravděpodobnost srážky tří částic zároveň je málo pravděpodobná – trimolekulární reakce nejsou tak běžné

Reakční kinetika

– pro rychlost bimolekulární reakce typu



formulovali Guldberg a Waage závislost:

$$v = k [A][B]$$

- kde $[A]$ a $[B]$ je okamžitá koncentrace látky a k je konstanta úměrnosti označovaná jako rychlostní konstanta
- Rychlost je tudíž přímo závislá koncentraci

Reakční kinetika

- Reakce izolované
 - reakce prvního řádu (monomolekulární)
 - rychlost je úměrná první mocnině okamžité koncentrace látky

$$v = k[A] = - \Delta[A] / \Delta t$$

- úpravou tohoto vztahu získáme závislost koncentrace látky A na čase

$$[A] = [A]_0 e^{-k \cdot t}$$

- pro monomolekulární reakce se zavádí pojem poločas rozpadu
 - čas, za který klesne koncentrace látky klesne na polovinu

Reakční kinetika

– reakce druhého řádu (bimolekulární)

- rychlostní rovnice má tvar:

$$v = k_2 [A][B] = - \Delta[A] / \Delta t$$

- úpravou tohoto vztahu dostaneme závislost okamžité koncentrace látky A na čase

$$1 / [A] = 1 / [A]_0 + k_2 t$$

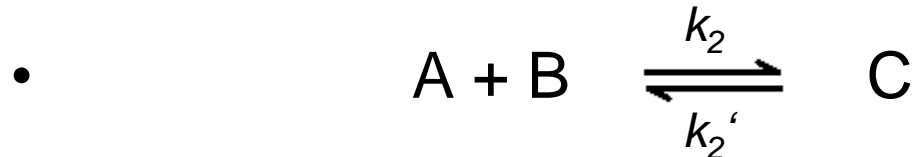
- poločas reakcí druhého řádu je závislý na koncentraci látky A (narozdíl od poločasu reakcí 1. řádu)

Reakční kinetika

- Simultánní reakce

- zvratné reakce

- můžeme je popsat obecnou rovnicí:



- výsledná rychlost reakce vzhledem k látce A je dána rozdílem rychlostí přímé a zpětné reakce (rychlostí úbytku a zvyšování koncentrace A)

Reakční kinetika

– reakce následné

- nejjednodušší případ můžeme popsat obecným schématem:

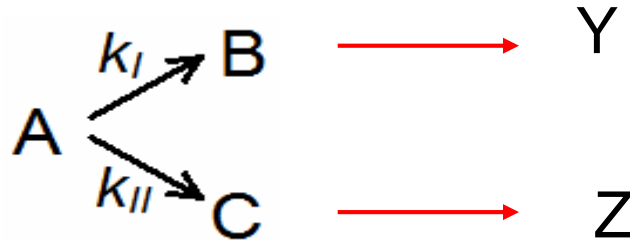


- koncentrace látky A se průběhem 1. reakce snižuje
- koncentrace látky B se průběhem 1. reakce zvyšuje, tím se ale také zrychluje její úbytek 2. reakcí
- koncentrace látky C se průběhem 2. reakce zvyšuje

Reakční kinetika

– reakce bočné

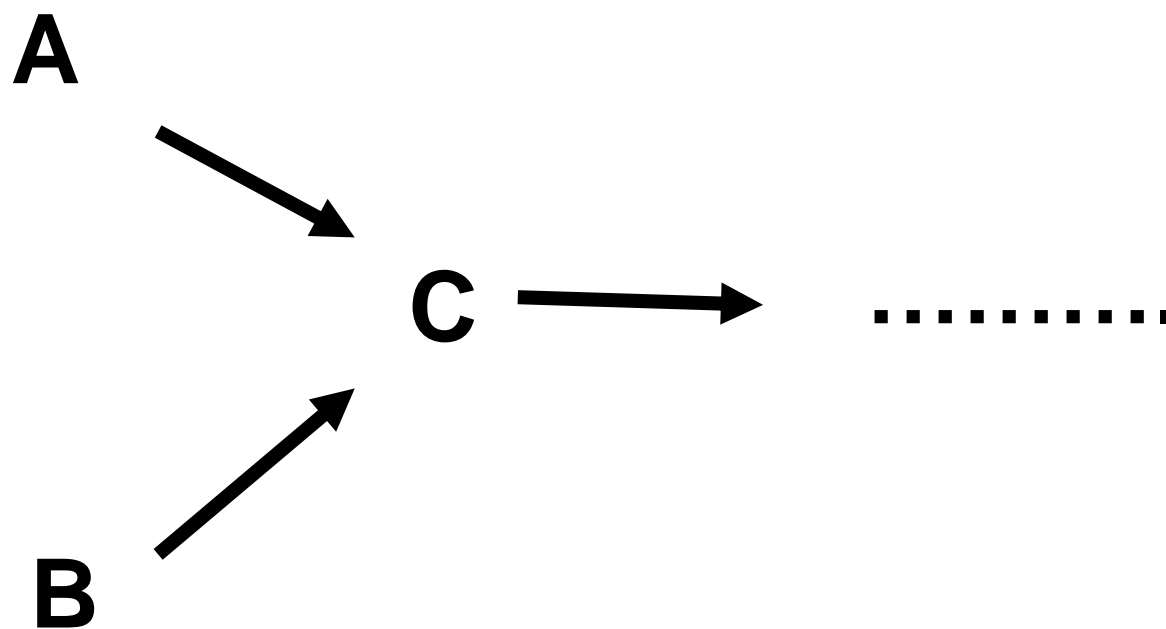
- nejjednodušší případ můžeme popsat reakčním schématem:



- rychlost reakcí I a II je závislá na koncentraci A a na jejich rychlostních konstantách
 - látky B a C vznikají v poměru daném poměrem jejich rychlostních konstant

Druhý posel – moderní léčiva. Původně se podávala látka A. To vyvolalo tvorbu C (požadované) i B – možné vedlejší účinky. Dnes snaha ovlivňovat např. C – což nevede ke vzniku Y z produktu B (mezení vedlejšího účinku)

- Reakce konkurenční



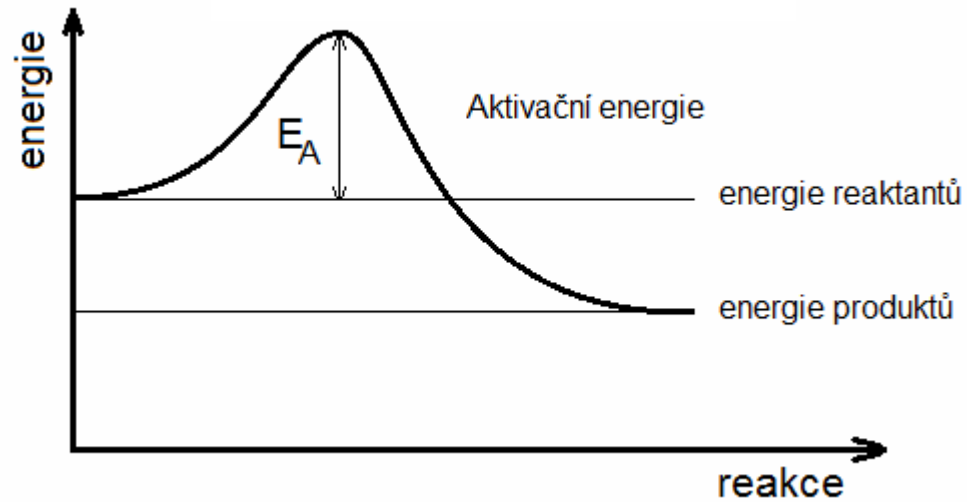
- Příklad léčby i nespecifické

Reakční kinetika

- Srážková teorie

Reakční kinetika

– aktivační energii E_A



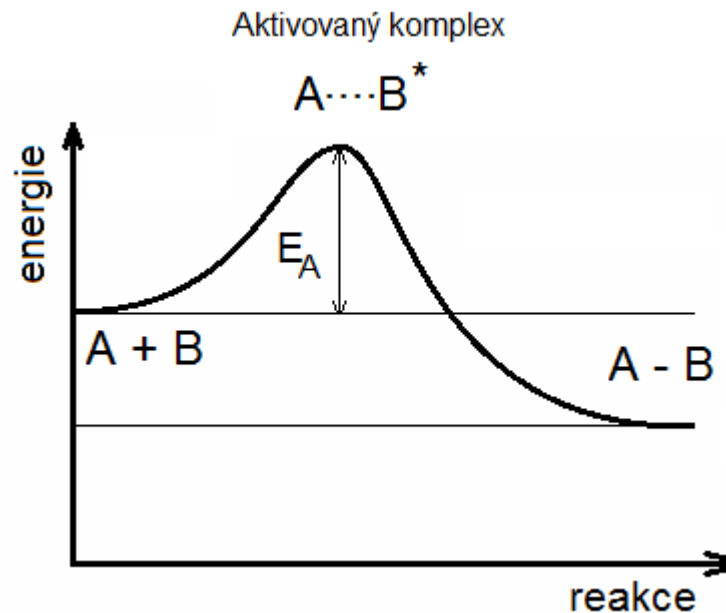
Reakční kinetika

Faktory, které zvyšují rychlost reakce:

Reakční kinetika

- Teorie aktivovaného komplexu

Reakční kinetika



Reakční kinetika

- Katalýza

Katalyzátor

- 4 podmínky, které musí látka splňovat abychom mluvili o katalyzátoru.

Reakční kinetika

- **přítomnost katalyzátoru způsobuje změnu rychlosti probíhající reakce**
 - **pozitivní**
 - **negativní (inhibice)**
 - **princip katalýzy**

Enzymatická katalýza

Enzymy - biokatalyzátory, urychlují v podstatě všechny reakce v těle

- **Michaelis – Mentenová**
- **$\frac{1}{2}$ max. rychlosti**